

Ferroelectric, Switchable Dielectric and Nonlinear Optical Properties in Inorganic–Organic Lead-Free 1D Hybrids Based on Bi(III) and Azetidine: $(\text{C}_3\text{NH}_8)_2[\text{BiCl}_5]$, $(\text{C}_3\text{NH}_8)_2[\text{BiBr}_5]$

Autorzy

Magdalena Rok
Bartosz Zarychta
Jan K. Zaręba
Aleksandra Krupińska
Błażej Dziuk
Piotr Durlak
Rafał Janicki
Ryszard Jakubas
Grażyna Bator
Wojciech Medycki
Michaela Zamponi
Anna Piecha-Bisiorek

Rok wydania

2024

Czasopismo

Journal of Physical Chemistry
Letters

Numer woluminu

15

Strony

11709-11722

DOI

10.1021/acs.jpcllett.4c02695

Streszczenie

This study investigates lead-free organic–inorganic hybrids $(\text{C}_3\text{NH}_8)_2[\text{BiCl}_5]$ (**ABC**) and $(\text{C}_3\text{NH}_8)_2[\text{BiBr}_5]$ (**ABB**), focusing on their structural, dielectric, ferroelectric, and optical properties. Both compounds exhibit paraelectric (**I**) to ferroelectric (**II**) phase transitions (PTs) at 230/233 K and 228/229 K, respectively, transitioning from orthorhombic (*Pnma*) to monoclinic (*P2₁*) phases, with distorted $[\text{BiX}_6]^{3-}$ octahedra forming 1D chains. Quasielastic neutron scattering and solid-state ^1H NMR studies reveal the localized motion of azetidinium cations. Dielectric measurements of **ABC** and **ABB** show step-like permittivity changes by 11–12 units post-transition **I** → **II**, demonstrating reversible switching behavior. Absorption studies reveal band gaps of 3.24 eV for **ABC** and 2.76 eV for **ABB**, classifying them as insulators. Luminescence spectra at 77K display 578 nm (**ABC**) and 708 nm (**ABB**) emissions, attributed to $^3\text{P}_{1,0} \rightarrow ^1\text{S}_0$ transitions. Both compounds demonstrate stable second harmonic generation (SHG) switching of the *on–off* type. The switching performance is evaluated over multiple thermal cycles using the t_{req} metric, which decreases with increasing temperature change rate and indicates that **ABB**'s SHG switching is approximately 30% faster than that of **ABC**.

Słowa kluczowe

Cations, Crystals, Nonlinear optics, Phase transitions, Polarization

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Licencja otwartego dostępu

CC-BY

Licencja na prawach której można swobodnie kopiować, rozprowadzać, zmieniać i remiksować objęty prawem autorskim utwór (Utwór-przedmiot prawa autorskiego) pod warunkiem podania imienia i nazwiska autora utworu pierwotnego oraz źródła pochodzenia utworu.

Pełny tekst licencji:

<https://creativecommons.org/licenses/by/3.0/pl/legalcode>

Adres publiczny

<http://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcllett.4c02695>

Strona internetowa wydawcy

<https://www.acs.org/content/acs/en.html>

Plik został wygenerowany dnia 2026-08-26 13:03:29

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/XqTvUsD>.